



TITLE:

III S電子によるスクリーニング(価数揺動状態をめぐる理論の現状,科研費研究会報告)

AUTHOR(S):

近藤, 淳

CITATION:

近藤, 淳. III S電子によるスクリーニング(価数揺動状態をめぐる理論の現状,科研費研究会報告). 物性研究 1983, 40(2): 17-20

ISSUE DATE:

1983-05-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/90935>

RIGHT:

金属中のS電子によるスクリーニングについては古くからプラズマ振動によるスクリーニングが考えられており (Debye)、長距離のクーロン力が短距離力に置かれる。近似によつて screened Coulomb, 又は Friedel 型となる。このプラズマ振動は非常にはやいかう金属中にテストチャージがおかれたとき、速かにスクリーニングが起るといわれていた。しかしS電子系はもつとやつくしたレスポンスも行うことが最近認識されてきた。それはフェルミ面のごく下の電子をそのごく上へあげることに対応するもので、典型的なのは Mahan-Nozières-de Dominicis の問題である。外部からX線があたつて金属中の原子の深いレベルの電子が伝導帯にあげられると、あそこ正の孔が出来る。出来た瞬間は裸のクーロン力が効くが、速かにプラズマ振動で長距離部分がスクリーンされ、更にジワジワと短距離部分もスクリーンされてゆく。最後に落ち着いたポテンシャルは Friedel の self-consistency の条件を満たすものでなければならず、またS電子の全波動関数については、Anderson の直交定理によつて、最後に落付いたものは最初の無揺動の全波動関数と直交している。一般に金属中で広い意味の valence fluctuation が起るとき、それに対するS電子のレスポンスのうちで上にのべた低周波のものが重要な役割をはたすことがある。以下ではそれについてのべよう。

金属中でただけ離れた2つの site の間を1つの粒子が hopping しながらい往復しているとしよう。粒子が1の site にあるとき (擬スピン $\sigma_z = +\frac{1}{2}$ で表わすことにする)、その電荷をスクリーンするようにS電子は rearrange され、上にのべたような状態が成立する。粒子が2の site に移ると ($\sigma_z = -\frac{1}{2}$ で表わす)、S電子はそれに対応するように再び rearrange され、新しい状態に落ち着く。この2つの状態はやはり互に直交している。そのため2つの site 間の transfer integral には重なり積分のようなものが現れて裸の transfer integral よりも小さくなる。いわばS電子の衣を着るという効果が現れる。このことを次のようなモデルで計算してみよう¹⁾:

$$\sum_k \epsilon_k a_k^\dagger a_k - \Delta \sigma_z + V_0 \sum_{kk'} \left[\left(\frac{1}{2} + \sigma_z \right) e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \frac{\vec{a}}{2}} + \left(\frac{1}{2} - \sigma_z \right) e^{-i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \frac{\vec{a}}{2}} \right] a_{k'}^\dagger a_k \quad (1)$$

第1項から、S電子の運動エネルギー、粒子を site 間に移す項、相互作用であり、粒子が1の site にいるとき $\vec{a}/2$ の位置を中心として電子に V_0 というポテンシャルが加わり、2の site にいるときは $-\vec{a}/2$ の位置を中心として V_0 が加わる。

まず基底状態のエネルギーを V_0 の摂動展開で計算すると

$$E(\Delta) = E(\Delta=0) - \frac{1}{2} \Delta \cdot \left(\frac{\Delta}{D} \right)^K \quad K \equiv V_0^2 \rho^2 \left(1 - \frac{\sin^2 k_F a}{k_F^2 a^2} \right) \quad (2)$$

ρ は1スピン当りの状態密度、 D はS電子のバンド巾程度。但し V_0^4 までは計算して高次は推定した。これは $\Delta=0$ のまわりに展開出来ない。次に $T \gg \Delta$ のときは自由エネルギー

は Δ について展開出来ると考えられ、

$$F = F_0 - \frac{1}{2} \chi \Delta^2$$

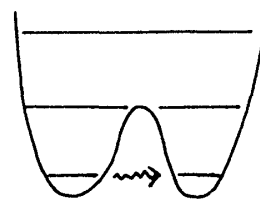
とすると $\chi = (4T)^{-1} (T/D)^{2K}$ となる。 $-\frac{1}{2} \chi \Delta^2 = -\frac{1}{2} \chi_0 \Delta_{\text{eff}}^2$ ($\chi_0 = (4T)^{-1}$) と書く
 くと $\Delta_{\text{eff}} = \Delta (T/D)^K$ となり、 $T=0$ の結果とあわせ

$$\Delta_{\text{eff}} / \Delta = \begin{cases} (\Delta/D)^K & T \ll \Delta \\ (T/D)^K & \Delta \ll T \end{cases} \quad (3)$$

となる。山田・芳田²⁾はこの問題の $T=0$ における重なり積分を V_0 の展開による計算した。それによると、 K に相当する量は phase shift δ と $j_0(k=a)$ の複雑な関数であるが $V_0 \rho$ が小さいときは (2) と一致する。

このような s 電子の衣を着る効果は、金属中のプロトンやミューオンが quantum diffusion

においてみられるはずである。quantum diffusion というのは粒子の質量が軽くて 1-a 図のようにトンネル効果（つまり Δ ）で diffuse するのをいい、質量が重くて 1-b 図のようにポテンシャルの山をこえて diffuse するときには上のような効果は期待出来ない。



1-a 図



1-b 図

しかし現実には更に phonon の衣を着る効果があつて今までの所はつまりした結論は得られていない。

次に μ 粒子が 2 つだけでなく金属中で格子を組んでいる場合を考えよう。つまり粒子はタイトバインディングのバンドで表わされるとする。その transfer integral は s 電子の ϵ_F (又は D) より十分小さいとしよう。例えば遷移金属中の d 電子と考えてもよい。このとき d 電子が s 電子の衣を着る = による質量変化を考えよう。粒子のエネルギースペクトルを E_q 、 s 電子のそれを ϵ_k とし、相互作用を V_0 とすれば粒子のエネルギー E_q に対する 2 次摂動は

$$E_q' = E_q - V_0^2 \sum_{k,k'} \frac{f_k (1-f_{k'})}{E_{q+k-k'} - E_q + \epsilon_{k'} - \epsilon_k} \quad (4)$$

(i) T が E_q のバンド中より十分大きいとき、上式は $E_{q+k-k'} - E_q$ について展開出来て

$$E_q' = E_q - V_0^2 \sum \frac{f_k (1-f_{k'})}{\epsilon_{k'} - \epsilon_k} + V_0^2 \sum \frac{f_k (1-f_{k'})}{(\epsilon_{k'} - \epsilon_k + i\delta)^2} (E_{q+k-k'} - E_q) \quad (5)$$

が 2 項は q によらないから省略する。今 E_q として

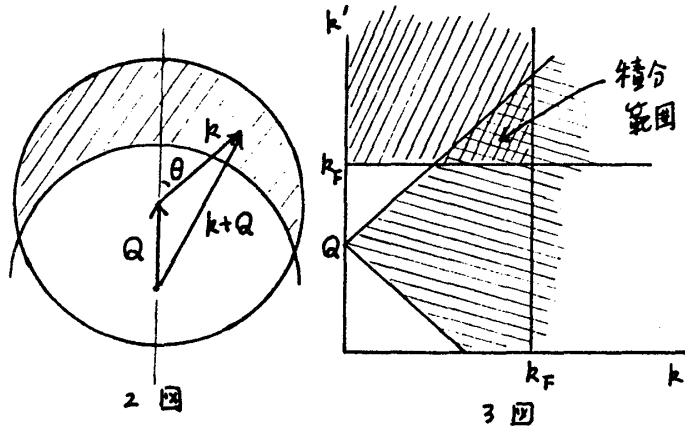
$$E_q = 2\Delta (\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a) \quad (6)$$

とすると $E_q' = E_q [1 + K \ln(T/D)]$ と計算される。これは (3) と consistent である。

(ii) 次に $T=0$ とする。二つの式 (4) を

$$E'_q = E_q - V_0^2 \sum_{k < k_F} \sum_{|k+Q| > k_F} \frac{1}{\epsilon_{k+Q} - \epsilon_k + E_{q-Q} - E_q} \quad (7)$$

と書く。和は \vec{k} 及び \vec{Q} について行う。まず \vec{k} については $k < k_F$ について行いが、 θ の代りに $|\vec{k} + \vec{Q}|$ について行うと便利である。すると



$$E'_q = E_q - \frac{V_0^2 V}{(2\pi)^2} \sum_Q \frac{1}{Q} \int dk \int dk' \frac{1}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + E_{q-Q} - E_q} \quad (8)$$

となり、 k, k' の積分範囲は 3 図 のようである。積分は容易に実行出来て二重積分は

$$\frac{2m}{\hbar^2} F\left(\frac{E_{q-Q} - E_q}{\epsilon_F}, \frac{Q}{k_F}\right)$$

となる。 $F(\delta, p)$ は δ について展開すると $\delta^0, \delta \ln|\delta|, \delta^2$ 等が生じるが、 δ^0 は q に依存しないから省略し、 $\delta \ln|\delta|$ と δ の和とすると

$$F(\delta, p) = \begin{cases} \frac{1}{4} \delta \left\{ \ln|\delta| - \frac{1}{2} \ln(4p^2 - p^4) \right\} & 0 < p < 2 \\ \delta \left(\frac{1}{2p} - \frac{1}{8} \ln \frac{p+2}{p-2} \right) & 2 < p \end{cases} \quad (9)$$

となる。 Q についての積分は実行出来るものと出来ないものがある

$$E'_q = E_q + V_0^2 p^2 E_q \left[\left(1 - \frac{\sin^2 k_F a}{k_F^2 a^2}\right) \ln \frac{\Delta}{2\epsilon_F} + \frac{1}{k_F a} \left(1 - \frac{\sin 2k_F a}{2k_F a}\right) \int_0^{2k_F a} \frac{\sin x}{x} dx - \frac{\sin^2 k_F a}{k_F^2 a^2} \int_0^{2k_F a} \frac{1 - \cos x}{x} dx \right] - \frac{1}{4\pi} V_0^2 p^2 \frac{\Delta}{k_F^2} \int_0^{2k_F} d^3 Q \frac{1}{Q} \sum_{xyz} \left(\sin q_x a \sin Q_x a - 2 \cos q_x a \sin^2 \frac{Q_x a}{2} \right) \times \ln \left| \sum_{xyz} \left(\sin q_x a \sin Q_x a - 2 \cos q_x a \sin^2 \frac{Q_x a}{2} \right) \right| \quad (10)$$

の 2 項はバンド中の変化としてまとめられるものであり、(3) と consistent であるが、残りの項は特異な q 依存性を示す。

次に $E_q = \hbar^2 q^2 / 2M$ の場合を考えよう。これは 1-b 図をもつ極端にしてポテンシャルの曲線を平らにしてしまった場合である。このとき

$$E_{q+k-k'} - E_q = \frac{\hbar^2}{M} q \cdot (k-k') + \frac{\hbar^2}{2M} (k-k')^2$$

式(5)に代入すると、第1項の寄与は0となり、第2項の寄与は q によらないから質量変化は生じない。つまり衣を着る効果は自由粒子に対しては起らない。(このとき(5)の展開は $T \gg T_F m/M$ のとき成立) また $E_q = \hbar^2 q^2 / 2M$ を(8)に代入すると

$$E'_q = E_q \left\{ 1 - \frac{2}{3} V_0^2 p^2 \left[1 - \frac{1}{5} \left(\frac{q}{k_F} \right)^2 \ln \frac{q}{k_F} \right] \right\}$$

が得られる。 $\log(m/M)$ に比例したような質量変化はない。このように $E_q = \hbar^2 q^2 / 2M$ のときは質量変化は小さいが、vertex correctionは存在する。³⁾ $T \gg T_F m/M$ のときには V_0 が $V_0 (D/T)^2 V_0^2 p^2$ となる。

最後に s-d mixing のスクリーニングについて考える。通常のアンダーソン模型

$$H = \sum_k \varepsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \varepsilon_d \sum_\sigma c_\sigma^\dagger c_\sigma + V_{sd} \sum_{k\sigma} (a_{k\sigma}^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_{k\sigma}) + U c_\uparrow^\dagger c_\uparrow c_\downarrow^\dagger c_\downarrow$$

においては $\Delta = \pi V_{sd}^2 \rho$ が特徴的なエネルギーとして現れる。電子が d から s へ移ると d の抜けあきにより $+e$ の電荷が生じこれが s 電子にポテンシャルを及ぼし、 s 電子はこれをスクリーンしようとする。この効果が Δ にどのような影響を及ぼすか？

$$V_0 \left(\sum_{k\sigma} a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} \right) (1 - c_\uparrow^\dagger c_\uparrow - c_\downarrow^\dagger c_\downarrow)$$

という項をつけ加える。これは d が1コいるとき正の電荷を丁度打消すようになっているとする ($V_0 < 0$)。非対称アンダーソン模型 ($\varepsilon_d = V_0$ による s 電子エネルギーの変化) の場合、 $U = \infty$ として分配関数を V_{sd} で展開してみると特徴的なエネルギーとして⁴⁾

$$\frac{\Delta_{\text{eff}}}{\Delta} = (\Delta \cdot \rho)^{-\frac{\varepsilon}{1+\varepsilon}} \quad \varepsilon = \frac{2\delta}{\pi} - 2 \left(\frac{\delta}{\pi} \right)^2 \quad \tan \delta = -\pi V_0 \rho$$

が得られる。εとして δ の1次の項を含むのが今までと違う。 δ^2 の項は直交定理から来たりこれだけなら $\Delta_{\text{eff}}/\Delta < 1$ となるが、1次の項があるので $\Delta_{\text{eff}}/\Delta > 1$ となる。1次の項は Nozières-de Dominicis と同じものである。

- 1) J. Kondo, Physica 84B (1976) 40.
- 2) K. Yamada and K. Yosida, Prog. Theor. Phys. 62 (1979) 363.
- 3) J. Kondo and T. Soda, J. Low Temp. Phys.
- 4) J. Kondo, Physica 104B (1981) 265.